

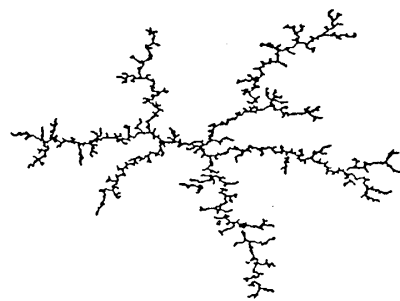
Title	DLAおよびBJクラスターのf- スペクトラム(拡散に支配された凝集(DLA)とそれに関連した現象,研究会報告)
Author(s)	早川, 美德
Citation	物性研究 (1987), 48(2): 102-106
Issue Date	1987-05-20
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2433/92532">http://hdl.handle.net/2433/92532</a>
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

DLA およびBJ クラスターの  $f-d$  スペクトラム

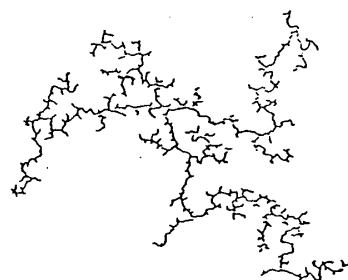
東北大・通研 早 川 美 徳

成長するランダムパターンの研究が、最近精力的に行なわれており、拡散に支配された凝集 (Diffusion-Limited Aggregation; DLA) とそれに関連した現象は、中でも関心の持たれる分野の一つである。DLA は拡散律速型の界面の不安定をモデル化したもので、表面張力のように表面をならす効果は一切考慮されていないために、得られるパターンは非常に複雑な樹枝状構造を呈する。計算機シミュレーション等から、クラスターが自己相似的であることが知られており、そのフラクタル次元  $d_f$  はDLA パターンをよく特徴づけている。格子の異方性等が問題にならない場合、 $d$  を空間の次元とすると  $d_f = (d^2 + 1) / (d + 1)$  が良く成り立ち、 $d_f$  は実験的に得られたパターンがDLA で理解できるかどうかの重要な手がかりである。しかしパターンのフラクタル性自体はDLA に固有のものではないし、DLA のような成長モデルが一つの指数  $d_f$  によって完全に記述できるとは考えられない。例えば後述するように Botet-Jullien モデル<sup>1)</sup> と呼ばれる平衡モデルのシミュレーションで得られるクラスターと、DLA を拡張したあるモデルは同じフラクタル次元を持つが、パターン形成のメカニズムは全く異なる。(図1参照)ここではDLAの成長界面の統計的性質を調べ、非平衡系でのパターン形成をどのように特徴づけるかを考える。

DLAの計算アルゴリズムは、ブラウン運動粒子を用いたモンテカルロ法によっている。クラスターの十分遠方から酔歩して来た粒子がクラスターの最近接点に到来した場合に粒子はそこで酔歩を止めクラスターの一部となる。このような不可逆的過程を繰り返すことによって複雑な樹枝状クラスターが得られる。このとき、クラスター表面に粒子の到来する確率は次のように書ける。ラプラス方程式  $\nabla^2 \phi = 0$  を満足するような場  $\phi$  を考え、クラスター表面で  $\phi$  は一定、他方外部の境界は十分遠方にあつてクラスターとの間にポテンシャル差が与えられているとしよう。その時DLAクラスターの表面のある点Aに粒子が付着する確率、すなわちクラスターの成長確率  $P_g(A)$  は  $\phi$  を使って



(a)



(b)

図1 (a) 2次元  $\eta$ モデルで  $\eta = 2$  とした場合に得られるクラスター。(b) Botet-Jullien モデルによるクラスター。

$P_g(A) \sim |\nabla \phi(A)|$  と表わすことができる。これは界面の成長速度がその場所への流れに比例していることに他ならない。あるいは、これをさらに一般化して  $P_g(A) \sim |\nabla \phi(A)|^\eta$  で成長するような規制も考えられ、誘電破壊のモデルとして提案されている (NPW モデル、 $\eta$  モデル)。一回の成長ステップに複数個のランダムウォーカーを用いることによって、DLA と同様に  $\eta$  モデルのモンテカルロ・シミュレーションを行なうことができる。

DLAにおいて枝どおしは反発的であり、開いた構造のクラスターを形成するため、クラスターの中心近くでも成長確率は完全に零とはならない。その意味で成長確率はクラスターの全表面に分布しているが、主に成長に寄与するのはクラスターの外側の部分であり、とりわけ主な枝の先端部に成長確率が集中している。図2は3万個の粒子から成るDLAクラスターのうち最後に付着した3000個のみを描いたものであるが、クラスターの外側が選択的に成長しているのがわかる。このように非一様な確率分布を定量化する試みとして、Halsey らが力学系の議論に導入した一般次元  $D_q$  および  $f-\alpha$  スペクトラムを用いる方法がある<sup>2)</sup>。確率が空間的に分布している場合、空間をサイズ  $\epsilon$  の箱に分割し、 $i$  番目の箱の内部に確率  $P_i(\epsilon)$  があるとする。このとき一般化次元  $D_q$  は

$$D_q = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{q-1} \frac{\log \sum_i P_i^q(\epsilon)}{\log \epsilon}$$

で定義される。 $D_0$  は分布のハウスドルフ次元を表わすが、DLAのようにクラスターの全表面に確率が分布する場合の  $D_0$  はクラスター表面のハウスドルフ次元に一致すべきである。DLAにおけるクラスター表面の次元とは、クラスター自身のフラクタル次元に他ならない。 $D_1$  は情報次元と呼ばれる量で

$$D_1 = \lim_{q \rightarrow 1} D_q = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\sum_i P_i(\epsilon) \log P_i(\epsilon)}{\log \epsilon}$$

で定義される。成長パターンの場合、物理的に  $D_1$  は active surface の次元と考えられ、2次元DLAで  $D_1 = 1$  が数学的に証明されており<sup>3)</sup> 3次元空間では  $D_1 = 2$  であろうとの予想がある<sup>4)</sup>。

$D_q$  を正しく計算するためには確率分布をある程度正確に求めなければならない。その点でモンテカルロ法は不利

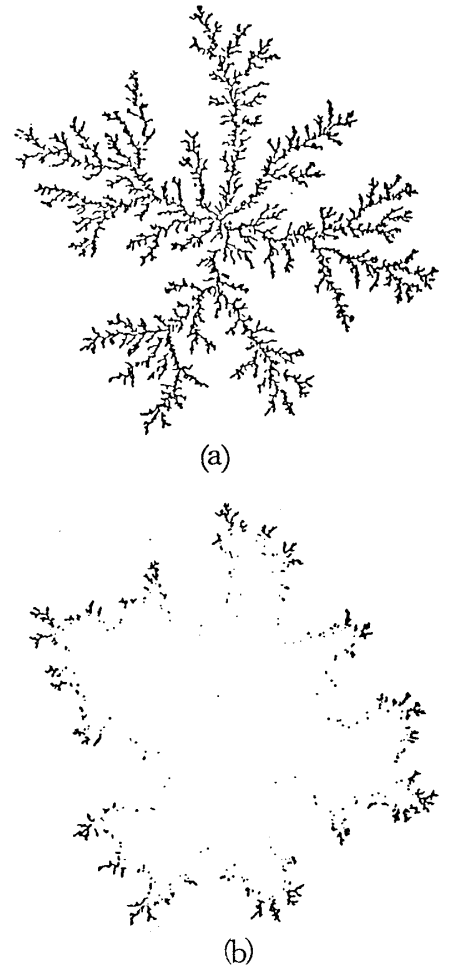


図2 (a) 3万個の粒子から成るDLAクラスター。(b) (a)のうち最後に付着した3000粒子のみをプロットしたもの。

であり、とくに成長確率の非常に小さい領域で正しい評価がむずかしい。そこで off-lattice モンテカルロシミュレーションで得た 2 次元 DLA および  $\eta$  モデルのパターンを境界条件にしてラプラス方程式を解き、成長確率を求めた。数値計算で求めた  $D_q$  を図3に示す。 $D_0$  はクラスターのフラクタル次元にほぼ等しいことが図からわかる。 $D_1$  は DLA ( $\eta = 1$ ) モデルの場合  $D_1(\eta = 1) = 1.04 \pm 0.02$  でほぼ予想された

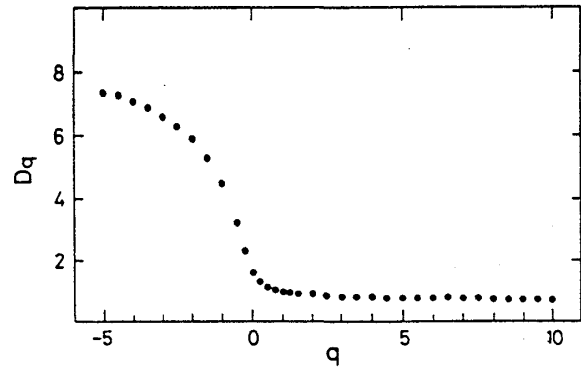


図3 DLAの付着確率について計算した一般化次元  $D_q$ 。

値である。さらに  $D_1(\eta = 2) = 0.77 \pm 0.01$ ,  $D_1(\eta = 3) = 0.58 \pm 0.02$  が数値的に得られた。これらは  $\eta$  モデルにおいて  $\eta$  が大きくなる程成長部分 (active surface) が局在化することに相当している。 $q$  が大きい値の場合  $D_q$  は確率の大きい部分、すなわちクラスターの先端部分の分布を反映しており、他方  $q$  が負の領域で  $D_q$  はクラスターの入り江の部分 (スクリーンされた部分) の確率分布によっている。DLAや  $\eta$  モデルでは  $D_q$  が確率分布の非一様性を反映して一定ではないが、これと対比する意味で次に Botet-Jullien モデルと呼ばれる平衡モデルにふれる。

Botet と Jullien は DLA の成長プロセスに粒子が再び離脱するプロセスを合わせ、全体の粒子数と単連結性を保ちながらクラスターが粒子の再配置を行なうモデルを考えた (BJ モデル)。表面からの離脱と再付着を繰り返すとクラスターは初期の形には依存せず定常的フラクタル構造に落ちつくことがシミュレーションによって知られており、例えば 2 次元 BJ クラスターのフラクタル次元は 1.5 であることが理論<sup>5)</sup> やシミュレーションから得られている。これは  $\eta$  モデルで空間が 2 次元、 $\eta = 2$  とした場合に知られているフラクタル次元と等しい。ところが図1に示したように、空間の埋まり方は両者とも似ているがクラスターの形状は異なっている。BJ モデルでパターンが定常になった後、粒子が再付着した場所を記憶し得られた点の集合から  $D_q$  を計算することができる。すると  $D_q$  の値は  $q$  によらず一定で  $D_q \simeq 1.5$  が得られた。このことはフラクタル次元が 1.5 であるクラスター表面に解率が一様に分布していることを表わしており、平衡モデルとしての BJ モデルを特徴づける事実である。

さて、ある点  $x$  のまわりの大きさ  $\varepsilon$  の箱の中に確率が  $P_x(\varepsilon)$  だけ存在し  $P_x(\varepsilon) \sim \varepsilon^\alpha$  と書けるときの  $\alpha$  を点  $x$  での Singularity と呼ぶ。DLA のクラスター表面上の点のまわりの確率分布を調べると、各点が異なる  $\alpha$  を持っており、 $\alpha$  が分布していることが確かめられる。このような複雑な分布を特徴付けるために Singularity  $\alpha$  を持つ点がフラクタル次元  $f$  で分布している

と仮定する。そうした時に  $f$  と  $\alpha$  は先に述べた  $D_q$  のルジャンドル変換によって得られることが知られている。

$$\alpha(q) = \frac{\partial}{\partial q} (q-1) D(q)$$

$$f(q) = \alpha(q) q - (q-1) D(q)$$

図3に対応する  $f-\alpha$  を図4に示す。同図から異なる  $\alpha$  を持つ点が分布していることが判る。BJモデルのように  $D_q$  が一定の場合  $f = \alpha = D_q$  であるし、パターンの周囲が単純な面 (線分) で構成されている場合にラプラス場の勾配で確率を定義しても  $f-\alpha$  は点になる。 $f-\alpha$  スペクトルが連続になるのは、フラクタル的なDLAクラスターの構造と、成長確率の与えられ方の双方に依っている。

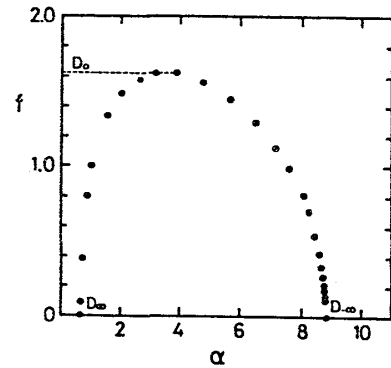


図4 図3のデータから求めたDLAの  $f-\alpha$  スペクトラム。

$\alpha(\infty) (=D_\infty)$  はメインブランチの先端部の Singularity に相当している。DLAの外形が多角形で近似できるとし、クラスターの大きさはその頂点の Singularity によって規定されるという仮定 (large wedge model) の下に、先端部の Singularity  $\alpha_{\text{TIP}} = d_f - 1$  が導かれている<sup>6)</sup>。ここで  $d_f$  はDLAクラスターのフラクタル次元である。 $\alpha(\infty)$  は  $\alpha_{\text{TIP}}$  と見なせるので数値計算で得た値 ( $\alpha(\infty) = 0.64 \sim 0.70$ ) は上式でよく説明できる。また成長の「突端部分」は非常に局在しているので  $f(\infty) = 0$  も妥当な結果であろう。逆に  $\alpha(-\infty)$  はDLAパターンの深い入り江におけるスクリーニングを反映していると思われ、いくつかのDLAクラスターについて  $\alpha(-\infty) \sim 9$  程度の値が得られた。しかしこの  $\alpha(-\infty)$  を裏づけるような理論はまだない。

ここでは、DLAモデルが平衡BJモデル等とは異なり、Singularityが分布するような複雑な確率分布を持つことを数値的に示した。情報次元はactive surfaceの次元という意味を持ち、DLAにおいては理論があるものの、一般の  $D_q$  や  $f-\alpha$  に対してここに示した計算結果を説明するような議論はまだない。また  $\alpha$  の分布密度が単純なスケーリングで説明できないという報告もある<sup>7)</sup>。DLAの成長確率分布について不明なことが多いが、DLAを特徴づけるのにフラクタル次元のみでは不十分であって、将来DLAの完全な理論を展開する際に  $D_q$  や  $f-\alpha$  は重要な材料になると思われる。

## 参 考 文 献

- 1) R. Botet and R. Jullien, Phys. Rev. Lett. 55 (1985) 1943.

- 2) T. C. Halsey et al., Phys. Rev. A33 (1986) 1141.
- 3) N. G. Makorov, Proc. London Math. Soc. 51 (1985) 369.
- 4) P. Grassberger (unpublished).
- 5) K. Honda et al. (to be published).
- 6) T. C. Halsey et al., Phys. Rev. Lett. 56 (1986) 854.
- 7) P. Meakin et al., Phys. Rev. A34 (1986) 3325.

## ランダム媒質中におけるクラックの成長モデルとサイズ分布

東北大・工 原 啓 明  
一橋大・経 岡 山 誠 司

図形に見られる自己相似性は直接パターンとして観察される。しかし地殻の亀裂、材質（金属、コンクリート等）に発生したクラックは、そのパターンを直接見ることは出来ず、非破壊検査によって各要素（亀裂、クラック）のサイズ分布を知るだけである。

実験によれば、サイズ分布は、状況（環境）によって、フラクタル次元に相当する log-log プロットの直線上（べき分布）には乗らない<sup>1), 2)</sup>。同様な事実はランダムカッティングのサイズ分布<sup>3)</sup>や、情報科学<sup>4)</sup>における（相対）度数—順位を表わすいろいろのグラにも見られる。

これはある意味では、フラクタルの概念を拡張する必要性があることを示唆している。

ここでは log-log プロットの直線からのずれを示す、ランダム媒質中におけるクラックのサイズ分布を、1つのモデルプロセスによって論じる。

ランダム媒質の構成要素として、大きさや応力 ( $\sigma$ ) に対する応答の仕方で類別されたセグメント (Seg.) を考える。Seg. の種類を  $E$  ( $= A, B, \dots$ ) で表わす。各 Seg. は、 $t$  (時間) —依存性のある特性長  $L(E, t)$  によって  $G(L(E, t))$  個の等質なサブセグメント (S. Seg.) に分割されるものとする。ただし、 $t < 0$  では各 Seg. の個数は、共通に  $G_0$  個とする (図1)。  $L(E, t)$  の  $t$  —依存性を求めるため、 $\sigma$  のもとで S. Seg. に検出不可能な、微小なマイクロクラック (m. c.) の成長する

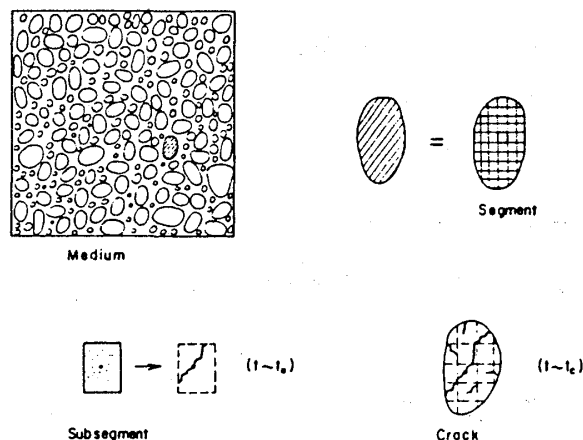


図 1